講義ノート

不規則系の統計物理学 (II)

松　田　博　嗣 (京大基研)

§4. Negative Eigenvalue Theorem.

前節に述べた Dyson の方法は数学的に複雑で実際の問題へは応用しにくい面が多い。これに対して，この節で解説する Dean と Martin (Proc. Phys. Soc. 259 (1961), 409) による Negative eigenvalue theorem にもとずく計算は取扱いが簡単で，以後の不規則格子に於る研究の出発点となった。この方法を linear chain に用いて，彼らは一次元不規則振動子系の振動数スペクトルにおける微細構造の存在を見い出した。

まず，次式で定義される対称行列を考えよう。(実際の問題では，これは系の Dynamical matrix に対応する。)

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_2 & & & 0 \\ \widetilde{\mathbf{B}}_2 & \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_3 & & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & & \mathbf{B}_N \\ & & & \widetilde{\mathbf{B}}_N & \mathbf{A}_N \end{pmatrix} \qquad \text{------------------ (4.1)}$$

ここで，$\mathbf{A}_j$ は $(\ell_j \times \ell_j)$，$\mathbf{B}_j$ は $(\ell_{j-1} \times \ell_j)$ の matrix であり，$\widetilde{\mathbf{B}}_j$ は $\mathbf{B}_j$ の transpose である。

ここで matrix $\mathbf{S}$ の固有値を求めるわけであるが，これは

$$\det | \mathbf{S} - x\mathbf{1} | = 0$$

を満たす x を求めることに相当している。(4.1) を次式の右辺のように分割しよう

$$\mathbf{S} - x\mathbf{1}_{\overline{N}} = \mathbf{L}(x)\,\mathbf{U}(x) \qquad \overline{N} = \Sigma \ell_j \qquad \text{------------------ (4.2)}$$

ここで

$$L(x) = \begin{pmatrix} I_{\ell_1} & & & & 0 \\ L_2 & I_{\ell_2} & & & \\ & L_3 & I_{\ell_3} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & L_N & I_N \end{pmatrix} \qquad \text{------------ } (4.3)$$

$$U(x) = \begin{pmatrix} U_1 & V_2 & & & \\ 0 & U_2 & V_3 & & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & & V_N \\ & & & & U_N \end{pmatrix} \qquad \text{------------ } (4.4)$$

(4.3)，(4.4)を用いて，(4.2)を explicit に書くと，

$$\left.\begin{aligned} A_1 - x I_{\ell_1} &= U_1 \\ A_j - x I_{\ell_j} &= L_j V_j + U_j \end{aligned}\right\} \text{ (diagonal element) -- } (4.5a)$$

$$\left.\begin{aligned} B_j &= V_j \\ \widetilde{B}_j &= L_j U_{j-1} \quad (j = 2, 3, \cdots) \end{aligned}\right\} \text{ (non-diagonal element) --- } (4.5b)$$

これより逆に，U_j は

$$\begin{aligned} U_j &= A_j - x I_j - \widetilde{B}_j U_{j-1}^{-1} B_j \\ U_1 &= A_1 - x I_{\ell_1} \end{aligned} \qquad \text{------------------ } (4.6)$$

ここで U_j の固有値を $u_{j\ell}$ ($j = 1, \cdots, N$) ($\ell = 1, \cdots, \ell_j$) としよう。
これ等の固有値は全て real である。この場合に次の定理が成立する。
『 x よりも小さい S の固有値の数は $u_{j\ell}$ の全ての組の負のものの数に等し

い。』

（証　明）

まず（4.2）より

$$\det|\mathbf{S}-x\mathbf{I}_N| = \det\mathbf{L}(x)\ \det\mathbf{U}(x)$$

$$= \prod_{j=1}^{N} \det\mathbf{U}_j(x)$$

従って

$$\det\mathbf{U}_N(x) = \frac{\det|\mathbf{S}-x\,\mathbf{I}_N|}{\prod_{j=1}^{N-1}\det\mathbf{U}_j(x)} \quad \text{-------------------}(4.7)$$

（4.7）右辺の分母子に共通の 0 点がないとする。この場合には $\det\mathbf{U}_N(x)$ の 0 点は $\det(\mathbf{S}-x\,\mathbf{I}_N)$ の 0 点となる。x が **S** の固有値 s_i を越して増加すると，simple root を仮定するならば $\mathbf{U}_N(x)$ の一つの固有値が符号を変えることになる。

$$\left.\begin{array}{l} x \gg 1 \text{ ならば } \{u_{j\ell}\} \text{ は　全て負。} \\ -x \gg 1 \text{ ならば } \{u_{j\ell}\} \text{ は　全て正。} \end{array}\right\} \quad \text{---------------}(4.8)$$

今，x を増して行き $\det\mathbf{U}_r$（$r<N$）が 0 を通って符号を変えたとする。$\mathbf{U}_r$ が小さい固有値 u と固有ベクトル **v** をもつとすれば

$\mathbf{U}_r^{-1} = u^{-1}\mathbf{v}\tilde{\mathbf{v}} + 0(u^{-1})$ としてよい

故に

$$\mathbf{U}_{r+1} \simeq -u^{-1}\tilde{\mathbf{B}}_{r+1}\,\mathbf{v}\,\tilde{\mathbf{v}}\,\mathbf{B}_{r+1} + 0(u^{-1})$$

このことは，$\mathbf{U}_{r+1}$ が $-u^{-1}$ に近い，大きな固有値をもつことを意味してい

る。そして u が zero を通り負から正に変るならば，$-u^{-1}$ は ∞ を通って正から負に変ることになる。負の $u_{j\ell}$ の数は不変である。

従って $\{u_{j\ell}\}$ の負の固有値の総数が変るのは

(i)　$\mathbf{U}_N$ の固有値が 0 を通って符号を変える。

(ii)　$\mathbf{U}_1$ の固有値が ∞ を通って符号を変える。

この 2 つの場合に限られるが (ii) は det $\mathbf{U}_1$ が極をもたないから除かれる。負の $u_{j\ell}$ の数は x が $\mathbf{S}$ の固有値 s_j を通って増加すると変り，その変化は ±1 でなければならない。

x を −∞ から +∞ まで変化させよう。（4.8）を考えに入れ，上述の事実を加味すれば負の $u_{j\ell}$ の数の変化はN回起ることになる。

つまり，x が $\mathbf{S}$ の固有値 s_i を通って増加すると負の $u_{j\ell}$ の数は一つ増す。従って，任意の段階で負の $u_{j\ell}$ の数は x より小さい s_i の数に等しいことになる。

§5　Schmidt の方法

この節では一次元の disordered − chain に対する Schmidt の方法（Phys. Rev. 105（1957），425）を考察しよう。

Schmidt の方法は，前節の式（4.1）で $\ell_j=1$ の場合に対して積分方程式を経て解を求めるものである。

madel として isotopic impurity を含む linear chain で，nearest neighbour 間のみにバネ常数があるとして説明する。m_j で j 番目の atom の mass を表わすことにしよう。（4.1）の $\mathbf{S}$ を Dynamical matrix とみれば

$$A_j = \frac{2K}{m_j}, \quad B_j = \frac{-K}{\sqrt{m_j\, m_{j+1}}} \quad \text{------------}(5.1)$$

K：バネ常数

対応して，U_j は

$$U_j = \left(\frac{2K}{m_j}-\omega^2\right) - \frac{K^2}{m_j\, m_{j-1}} \Big/ U_{j-1} \quad \text{------------}(5.2)$$

ここで

$$z_j = \frac{m_j}{K} U_j \quad \text{------------------------}(5.3)$$

とおく。これにより

$$z_j = \left(2 - \frac{m_j}{K}\omega^2\right) - \frac{1}{z_{j-1}} \quad \text{------------------------}(5.4)$$

この変換によって，負の U_j を求める問題は〃負の z_j を求める〃ことに等価となる。

次の変換により ξ_j を導入しよう。

$$z_j \equiv \frac{1}{\xi_j} \qquad \text{これによって}$$

$$\xi_j = \frac{1}{a_j - \xi_{j-1}}, \qquad a_j \equiv 2 - \frac{m_j}{K}\omega^2 \quad \text{------------}(5.5)$$

ξ_j の分布密度函数を $w_j[\xi]$ とし，a_j については等しく $f(a)$ ととる。そうすると

$$w_j[\xi] = \iint f(a) w_{j-1}[\xi'] \, \delta\left(\xi - \frac{1}{a-\xi'}\right) d\xi' \, da$$

$$= \int f(a) w_{j-1}\left[a - \frac{1}{\xi}\right] \left[\frac{d\left(\frac{1}{a-\xi'}\right)}{d\xi'}\right]^{-1} da$$

$$= \int f(a) w_{j-1}\left[a - \frac{1}{\xi}\right] \frac{1}{\xi^2} da \quad \text{------------}(5.6)$$

$M(\omega^2)$ を ω より小さい振動数の fraction とすると

$$M(\omega^2) = \int_{-\infty}^{0} w(z)\,dz, \quad w(z) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} w(z)\,dz = 1 \text{--}(5.7)$$

一般に $w_j[\xi]$ は singular な函数であるので，次式のような，その積分量を考える。

$$W_j(z) = \int_0^z w_j(z')\,dz' \quad \text{------------------------------} (5.8)$$

もし，a_j が離散値 $a^{(p)}$（$p=1,\ 2,\ \cdots,$）をとるとすれば

$$w_j[\xi] = \sum_p f_p\, w_{j-1}\left[a^{(p)} - \frac{1}{\xi}\right] \frac{1}{\xi^2}$$

となり，積分した量は

$$W_j[z] = \Sigma f_p\, W_{j-1}\left[a^{(p)} - \frac{1}{z}\right] - \widetilde{W}_{j-1}(-\infty) \text{----} (5.9)$$

（ここで $\widetilde{W}_j(z)$ は $\pm\infty$ に touch せずに 0 から 5z まで直接積分した $W_j(z)$ の branch である。）

函数 $W(z)$ は次の性質をもつ。

(i) $W(z) = \sum_p f_p\, W\left[a^{(p)} - \frac{1}{z}\right] - \widetilde{W}(-\infty)$

(ii) $W(z)$ は z の単調非減少函数

(iii) $\widetilde{W}[\infty] - \widetilde{W}[-\infty] = 1$

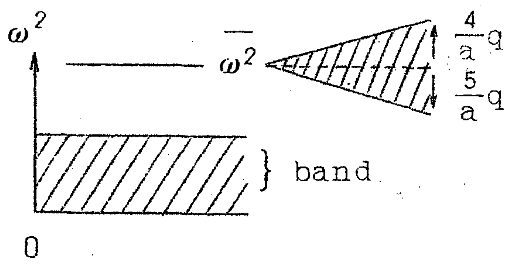
この手続きにより $W(z)$ が求まると

$$M(\omega^2) = -\widetilde{W}(-\infty)$$

が成立し，(5.7) により negative eigenvalue を求めたことになる。特別な例として二種類の mass が不規則に分布して軽い mass の濃度が q ($q \ll 1$) の場合について考えると impurity band においては

$$\omega^2 \approx \overline{\omega^2} = \frac{2}{M}\left(\frac{1}{\theta\left(1-\frac{\theta}{2}\right)}\right), \qquad \theta \equiv \frac{m}{M} < 1$$

であるが，この場合 schmidt は次のような結果を得た。



（図 5. 1）

$$M(\omega^2) = \begin{cases} 1 - \dfrac{q}{\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}|c|^{2\varepsilon}\right)^2} & \text{for } \omega^2 < \overline{\omega}^2 \\[2ex] 1 - q\dfrac{1 - |c|^{2\varepsilon}}{\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2}|c|^{2\varepsilon}\right)^2} & \text{for } \omega^2 > \overline{\omega}^2 \end{cases}$$

ここに

$$\varepsilon = \frac{q}{2\,\ell n \left| \left(\dfrac{2-\theta}{\theta} \right) \right|}, \qquad c = \left(\frac{\theta\left(1 - \dfrac{\theta}{2}\right)}{(1-\theta)^2} \right) \left(\frac{\omega^2 - \overline{\omega^2}}{\overline{\omega^2}} \right)$$

$M(\overline{\omega^2})$ を求めると，この場合は $c = 0$ となり

$M(\overline{\omega^2}) = 1 - \dfrac{4}{a}q$ となる。

cf.（図 5.1）

二種類の mass があるとき Schmidt の積分方程式を iteration により Agacy が数値的に計算し，Spectrum に Dean が得たと同様の fine structure を得た。

(Proc. Phys. Soc. 83 (1964), 172)

§6 Spectral gap

上のような数値計算の結果をみるといくつか状態密度が極めて小さい振動数が見られる。周期結晶のスペクトルに gap が存在し得ることはよく知られているが，非周期系においてはどうであろうか。

cf.

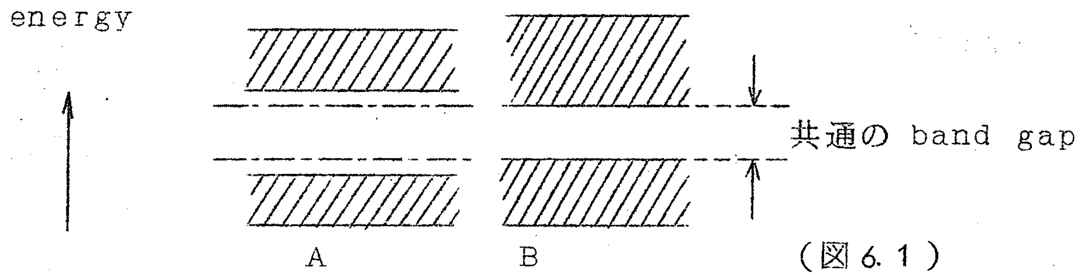
D. Saxon and R. Hutner

(Philps Res. Repts. 4 (1949). 81)

この節では Saxon — Hutner が推測した A−B alloy に於る Spectral gap について述べよう。

松田博嗣

AとBの band（一次元的に考える）が下図のようだとする。



（図6.1）

彼等は，″上図（6.1）の共通の band gap は A－B 合金でも gap になっているであろう，″と推測した。

例として Kronig－Penny model を考えた。

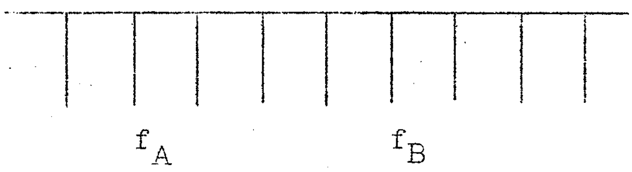


図6.2

図6.2の f_A, f_B は δ－potential の係数である。
彼等は，例えば AAAB …， ABAB …， ABBB …， 等の並び方を例にとり，これ等に対して band gap の存在することを検証した。

これに続いて上のようなモデルについて J. M. Luttinger (Philps Res. Repts. 6 (1951), 303) が Saxon－Hutner 型の定理を証明したが，この定理に対する反例を Kerner が提出した。(Proc. Phys. Soc. 69 (1956), 234)

彼によれば，下図（図6.3）の場合のように unit の block を考え，これに asymmetry がある場合には上述の定理が成立しなくなる。

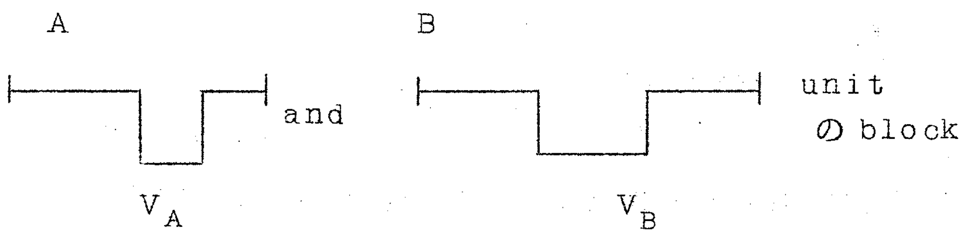


図6.3

§7 Spectral gap に対する一般的考察

cf.
H. Matsuda and K. Okada, Prog. Theor. Phys. 34 (1965), 539.

前節の話を発展させて，より一般的な立場から gap に対する考察を，この節では，行うことにしよう。

まず，次の様な Hermite 行列を考えよう。($+$ は Hermite conjugate を示す。)

$$H_N(x) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_2 & & \\ \mathbf{B}_2^+ & \mathbf{A}_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \mathbf{B}_N^+ & \mathbf{A}_N \end{pmatrix} \quad \text{------} (7.1)$$

(7.1) で x は parameter であり，従って $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ は x の函数になっている。Spectral gap を問題にする場合は x を系の energy にとる。こうすれば $\det H_N(x) \neq 0$ or $= 0$ の case が生じ，区間 (x_1, x_2) で $\neq 0$ の場合には，区間 (x_1, x_2) は gap の中にあることになる。

$\mathbf{A}_j$, $\mathbf{B}_j$ を p × p の行列とし，$\det \mathbf{B}_j \neq 0$ とする。つまり，$\mathbf{A}_j$, $\mathbf{B}_j$ が regular とする。

以下では N が大きい場合を問題にしよう。

$N g_N(x)\,dx$ を，$\det H_N(x) = 0$ の根で x と x + dx の間に入るものの数とする。$x_1 < x < x_2$ を満す x に対して $g(x) \equiv \lim_{N\to\infty} g_N(x) = 0$ ならば interval (x_1, x_2) は spectral gap になっている。

ここで p 一次元のベクトル $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \cdots, \mathbf{u}_N$ を導入しよう。
これにより

$$\begin{cases} \mathbf{A}_1 \mathbf{u}_1 + \mathbf{B}_2 \mathbf{u}_2 = 0 & \text{------} (7.2) \\ \mathbf{B}_j^+ \mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{A}_j \mathbf{u}_j + \mathbf{B}_{j+1} \mathbf{u}_{j+1} = 0 & \text{------} (7.3) \\ \mathbf{B}_N^+ \mathbf{u}_{N-1} + \mathbf{A}_N \mathbf{u}_N = 0 & \text{------} (7.4) \end{cases}$$

det $B_1 \neq 0$ であるから，上式は

$$\begin{cases} B_1^{+} u_0 + A_1 u_1 + B_2 u_2 = 0 & \text{(7.5)} \\ u_0 = 0 & \text{(7.6)} \end{cases}$$

と，変形出来る。

従って

$$u_0 = (\tilde{P} T_1 T_2 \cdots T_N P) u_N = 0 \qquad \text{(7.7)}$$

ここに，

$$T_j = \begin{pmatrix} -B_j^{+-1} A_j & -B_j^{+-1} B_{j+1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(7.8)}$$

(2P × 2P の transfer matrix)，であり

$P = \binom{1}{0}$, $\tilde{P} = (1\ 0)$ の unit matrix である。

$P u_N = \binom{u_N}{0}$, $T_N P u_N = \binom{u_{N-1}}{u_N}$ が成立するから，従って

u_N が non − trivial であるためには

$$\det |\tilde{P} T_1 T_2 \cdots T_N P| = 0 \qquad \text{(7.9)}$$

でなければならない。

ここで

$H_j \equiv T_j T_{j+1} \cdots T_N$ を定義しよう。

$X_j \equiv \tilde{P} H_j P$ $(j = 1, 2, \cdots, N)$ とすれば，$X_{N+1} = 1$

かつ $\binom{X_j}{X_{j+1}} = H_j P$. これにより，(7.9) は

$$\det X_1 = 0 \qquad \text{(7.10)}$$

となり，これは det $H_N(x) = 0$ に同じである。

$\mathbf{z}_j \equiv \mathbf{X}_j \mathbf{X}_{j+1}^{-1}$ で $\mathbf{z}_j$ を定義すると（7.10）は

(i) det $\mathbf{z}_1 = 0$ or (ii) det $X_2 = 0$ となる。

（7.10）と (ii) が同時に成立するのは端に対して特定の条件が成立つときのみなので (i) に注目し，以下の考察を進めよう。

まず transfer matrix を次のようにまとめる。

$$\begin{pmatrix} \alpha_j & \beta_j \\ \gamma_j & \delta_j \end{pmatrix} \equiv \mathbf{T}_{k_j} \mathbf{T}_{k_j+1} \cdots \mathbf{T}_{k_{j+1}-1} \equiv \mathbf{T}(k_j, k_{j+1}) \tag{7.11}$$

$(j = 0, 1, 2, \cdots, \ell-1;\ 1 \leq \ell \leq N,\ 1 = k_0 < k_1 < \cdots < k_\ell \leq N)$

以下

$\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1} \equiv \dfrac{\mathbf{A}}{\mathbf{B}}$ で略記する。

（7.11）を使うと，

$$\mathbf{z}_{k_j} = \frac{\alpha_j \mathbf{z}_{k_j+1} + \beta_j}{\gamma_j \mathbf{z}_{k_j+1} + \delta_j} \tag{7.12}$$

（7.12）をくり返せば，$\mathbf{z}_1$ は次の連分数形式で表わされる。

$$\mathbf{z}_1 = b_0 + \cfrac{a_1}{b_1 + \cfrac{a_2}{b_2 + \ddots + \cfrac{a_\ell}{b_\ell}}} \tag{7.13}$$

ここに，

$$b_0 \equiv \frac{\alpha_0}{\gamma_0},$$

$$b_p = \delta_{p-1} + \frac{\gamma_{p-1}\,\alpha_p}{\gamma_p}, \qquad (p=1, 2, \cdots, \ell) \qquad \text{------(7.14)}$$

$$a_1 \equiv \beta_0 - \alpha_0 \gamma_0^{-1} \delta_0,$$

$$a_p = \gamma_{p-2}\,(\beta_{p-1} - \alpha_{p-1}\,\gamma_{p-1}^{-1}\,\delta_{p-1}) \qquad (p=2, \cdots, N)$$

（全て，（p × p）の行列である。）

（7.13）を次のように変形しよう。

$$\mathbf{z}_1 = \{ 1 + \mathbf{z}(1, \ell) \}\, b\,。 \qquad \text{------(7.15a)}$$

$$\mathbf{z}(1, \ell) = \cfrac{a_1\, b_1^{-1}}{1 + \cfrac{a_2\, b_2^{-1}}{1 + \cdots + \cfrac{a_{\ell-1}\, b_{\ell-1}^{-1}}{1 + a_\ell b_\ell^{-1}\, b_{\ell-1}^{-1}}\, b_{\ell-2}^{-1}}\, b_1^{-1}}\, b_0^{-1}$$

ここに，

$\det b_j \neq 0$ を仮定している。

$\lim_{\ell\to\infty} \mathbf{z}(1, \ell) = \mathbf{z}$ とおく。z が存在する場合と，しない場合に分けて考察を進めよう。

(i) 存在する場合

$$\begin{cases} \det(\mathbf{1} + \mathbf{z}) \neq 0 & (イ) \\ \det(\mathbf{1} + \mathbf{z}) = 0 & (ロ) \end{cases}$$ この 2 つの case がある。

$x_1 < x < x_2$ の x に対して $\ell \to \infty$ で $\mathbf{z}(1, \ell)$ が一様に収束するならば case (イ) では band gap（Spectral gap）が生じ，case (ロ) でもモデル

の端の状態を変えることにより生ずる可能性がある。我々は端の状態には依存しないスペクトルの性質を問題にしている。一様収束の場合には z は x の連続函数となるので (ロ) でも端の状態を変えて (イ) にすることが出来るので，結局何れにしても gap となる。収束が一様でない場合は，未だ良く解っていない。

多分 $\int_{-\infty}^{x} \vartheta(x)\,dx$ は存在しても $\vartheta(x)$ は存在せず，固有状態は local-ize していると考えられる。

(ii) 存在しない場合

0と異なる $\vartheta(x)$ が常に存在するかどうか，未だ良く解っていない。

実際の計算に都合のいいように，以下の変換を導入する。

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad : \ (\, 2p \times 2p \,) \text{ の regular matrix}$$

ここで

$$\begin{pmatrix} \mathbf{X}_j \\ \overline{\mathbf{X}}_{j+1} \end{pmatrix} = \overline{\mathbf{T}}_j\, \overline{\mathbf{T}}_{j+1} \cdots \overline{\mathbf{T}}_N\, \mathbf{S}^{-1}\, P \qquad \text{とすれば}$$

$$\overline{\mathbf{T}}_j = \mathbf{S}^{-1}\, \mathbf{T}_j\, \mathbf{S}$$

これにより

$$\overline{\mathbf{z}}_j = \overline{\mathbf{X}}_j\, \overline{\mathbf{X}}_{j+1}^{-1} \qquad \text{であるから}$$

$$\mathbf{z}_1 = \frac{\{S_{11}\,\overline{\mathbf{z}}_1 + S_{12}\}\,\overline{\mathbf{X}}_2}{\{S_{11}\,\overline{\mathbf{z}}_2 + S_{12}\}\,\overline{\mathbf{X}}_3}$$

$$= \{S_{11}\,\overline{\mathbf{z}}_1 + S_{12}\}\,\overline{\mathbf{z}}_2\,\{S_{11}\,\overline{\mathbf{z}}_2 + S_{12}\}^{-1} \quad \text{------}(7.16)$$

従って一のついた行列で収束性を調べることが出来る。以下では例として p＝1，つまり linear chain の場合について具体的に考察を進めることにする。